

Computational Grids

Permite el intercambio de una amplia variedad de recursos distribuidos geográficamente. Superordenadores, bases de datos... Permite resolver a gran escala problemas intensivos.

El modelado molecular para el diseño de fármacos es un ejemplo de aplicación que puede beneficiarse de eso, ya que el desarrollo de fármacos puede prolongarse hasta 15 años. Por lo tanto una reducción en la línea de tiempo puede ser crucial. Muchas empresas de este tipo están tratando de lograr este objetivo a través de la aplicación e integración de tecnologías avanzadas como la biología computacional.

Las herramientas de laboratorio virtuales transforman la aplicación de modelado molecular existente en una aplicación de barrido de parámetros para ejecutar procesos de moléculas de conexión en los CDBs en paralelo en recursos distribuidos. La aplicación parametrizada contiene múltiples puestos de trabajo independientes, cada proyección diferentes compuestos para identificar el potencial de los medicamentos.

El Laboratorio Virtual se basa en las tecnologías Grid existentes y herramientas para realizar la búsqueda intensiva de datos de los recursos distribuidos. Proporciona nuevas herramientas para la gestión y el acceso remoto a bases de datos como un servicio de red.

En lugar de desarrollarse explícitamente como aplicaciones paralelas, que utilizan las interfaces como MPI, pueden estar compuestas como aplicaciones de parámetros de barrido, utilizando herramientas como Nimrod.

Una aplicación de acoplamiento que tiene la capacidad para detectar una molécula para cada ejecución. Esto se puede lograr mediante el uso de Nimrod-G lenguaje de especificación de parámetros para parametrizar los datos de entrada de aplicaciones y archivos.

No hay necesidad de realizar ningún cambio en la aplicación de acoplamiento (secuencial) existente ni deberá desarrollarse como aplicación paralela de forma explícita para la ejecución distribuida. Los usuarios sólo necesitan parametrizar los datos de entrada y los archivos de manera adecuada y definir un archivo de plan de Nimrod-G una vez.

En conclusión, Computational Grids permiten el intercambio y la agregación de recursos distribuidos geográficamente para resolver a gran escala, los recursos y los problemas con muchos datos más rápidos y más baratos. Sin embargo, la aplicación de desarrollo, gestión de recursos y la programación en estos entornos es una tarea compleja.

Se ha desarrollado un entorno de laboratorio virtual y las herramientas para la formulación de acoplamiento molecular para el diseño de fármacos como una aplicación de parámetros de barrido, la gestión de bases de datos químicos y de acoplamiento programación para la elaboración en una zona amplia distribución de los recursos mediante el aprovechamiento de las tecnologías Grid existentes.

Las nuevas herramientas desarrolladas incluyen un indexador de base de datos químicos, servidor BDC para proporcionar acceso a moléculas en las bases de datos químicos como un servicio de red y clientes para acceder a los servicios de CDB de un BDC seleccionado. Se han

utilizado el lenguaje de especificación de parámetros Nimrod-G para componer una solicitud de ataque existente como una aplicación de parámetros de barrido y el agente de recursos grid Nimrod-G para procesar los trabajos de conexión molecular de los recursos distribuidos.

Hemos llevado a cabo plazo, con presupuesto limitado, experimentos de programación para el procesamiento paralelo en el banco de pruebas de cuadrícula en todo el mundo en dos escenarios diferentes de optimización. Los resultados de esta programación de aplicación: acoplamiento molecular a gran escala recursos distribuidos demuestran la potencial de las herramientas del Laboratorio Virtual para la computación orientada a servicios. Demuestran la eficacia de la economía computacional y la calidad de servicios (QoS) programación impulsada como un mecanismo eficiente para la gestión de la oferta y la demanda de recursos en función del valor entregado al usuario.